

| | |
|-------------|---|
| Title | 量子のガラスと古典のガラス(3)分子科学、核理論における量子カオスと半古典理論,京大基研短期研究会 量子力学とカオス-基礎的問題からナノサイエンスまで-,研究会報告) |
| Author(s) | 寺本, 央; 高塚, 和夫 |
| Citation | 物性研究 (2004), 82(5): 713-714 |
| Issue Date | 2004-08-20 |
| URL | http://hdl.handle.net/2433/97868 |
| Right | |
| Type | Departmental Bulletin Paper |
| Textversion | publisher |

量子のガラスと古典のガラス

東京大学大学院総合文化研究科 ○寺本 央、高塚 和夫

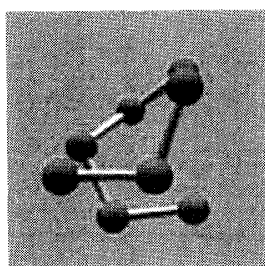
【序】古典クラスター系では、マジックナンバーに該当する 5 体、7 体、13 体などの対称性のいい系にガラス状態と呼ばれる擬似的相転移が見られることが知られている。すなわち、系全体のエネルギーを秩序パラメーターとして、低エネルギー領域である各配座の周りを微小振動している固体相と、高エネルギー領域である粒子がほとんど無秩序に動くような液体相との間に、間欠的にひとつの配座から他の配座へと経回る状態が存在する。その状態をガラス状態と呼ぶことにすると、ガラス状態の存在は、この場合には各配座のパッキングのよさとして理解することができる。

一方、量子クラスター系においては、そもそも多次元の量子計算が不可能であるから、そのような系においてガラス状態が存在するのか？あるいは、存在したとしてどのようなダイナミクスの違いが見えるのか？ということとは不明である。

そこで、本研究においては、上の二つの問題

1. 量子計算が可能
 2. 上の意味においてガラス状態を呈する
- を満たすようなポリマー2面角モデルを作成して量子計算を試み、エネルギースペクトルなどの性質を議論した。

【モデル】上の条件を満たすモデルは以下のようなものである。



自由度：5 自由度（5 つの 2 面角）
 ポテンシャル：2 体間に Morse Potential
 ボンド長：固定
 全角運動量：ゼロ

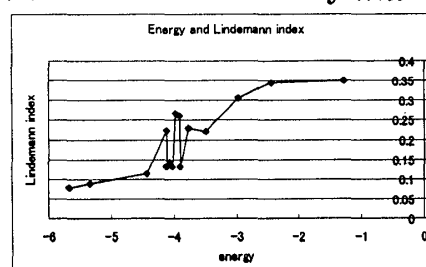
この系が、まずガラス状態を呈することを示すために、各エネルギーのトラジェクトリーに関して Lindemann-Berry 指数を計算したところ次のようになった。

Lindemann-Berry 指数とは

$$\delta(E) = \frac{2}{n(n-1)} \sum_{i < j} \frac{\langle r_{ij}^2 \rangle_i - \langle r_{ij} \rangle_i^2}{\langle r_{ij} \rangle_i}$$

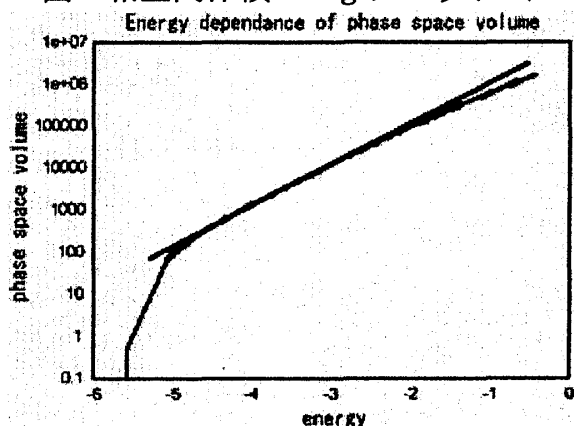
によって定義される。

図：Lindemann-Berry 指数



この下のインデックス i はトラジェクトリーの時間平均を表す。この指数は構造の揺らぎを表現できるよい秩序パラメーターになっている。このグラフを見ると構造があまり揺らがない固体相とソリッドな構造をもたない液体相との間に、指数が急激に立ち上がるエネルギー領域が存在することがわかる。このことは、この系があるエネルギー領域においてガラス状態を呈することを裏付けている。このもう一つの裏付けとして、平衡系のエントロピーを計算した。

図：相空間体積の log プロット (エントロピー)



このグラフを見ると、Lindemann-Berry 指数が急激に立ち上がるエネルギー領域において、温度（このグラフの傾きの逆数が温度に相当している）がほぼ直線になっていることがわかる。このことは中間領域のエネルギーにおいて、ガラス状態の存在を裏付ける。

【方法論】まず、2 面角ポリマーモデルのエネルギースペクトルを計算するために、この系の Hamiltonian を作成した。次にこの Hamiltonian のエネルギースペクトルを計算するために Vladimir A. Mandelshtam の Filter diagonalization を用いた。さらに系の対称性を考慮して symmetry-adapted を用いて対称性ごとにスペクトルの計算を行った。

【結果】エネルギースペクトルの上にこのモデルのポテンシャルの Disconnectivity-diagram (Mark A. Miller) を重ねて書いている。スペクトルの大まかな傾向としては Disconnectivity-Diagram の枝に相当するエネルギー領域にスペクトルが密集する傾向があることがわかった。この現象は固有関数のどのような状態に対応しているのかということは、スペクトルだけからではわからず、固有関数を見る必要がある。これは今後の課題としたい。

図：エネルギースペクトル

